

Измерение электрофизических свойств (емкости и проводимости) проведено в интервале температур 300 – 1000 К на приборе, предназначенном для автоматического измерения параметров емкостных объектов. Был использован измеритель LCS цифровой E7-18 ($\omega=1$ кГц). Температура в рабочем объеме контролировалась хромель-алюмелевой термопарой, подключенной к цифровому вольтметру.

Исследована температурная и концентрационная зависимости диэлектрической проницаемости и электропроводности $\text{Bi}_5\text{Nb}_3\text{O}_{15}$ и твердых растворов на его основе. При температурах выше 800 К с ростом концентрации допированного металла наблюдается резкое увеличение значений диэлектрической проницаемости и удельной электропроводности.

Ионная составляющая электропроводности твердых растворов сложных ниобатов висмута активируется для образцов, содержащих хром при температурах 400 К и выше; для образцов, содержащих медь или никель – 500 К и выше. Увеличение десятичного логарифма электропроводности в интервале температур 300-1000 К увеличивается в среднем на 5 порядков.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЯ КОМПЛЕКСОВ Bi(III) ИЗ АКВА-ТИОМОЧЕВИННЫХ РАСТВОРОВ

Шапник А.М., Кузнецов А.М.

Казанский государственный технологический университет

В рамках метода функционала плотности (версия B3LYP) с учетом влияния полярного растворителя в модели поляризованного континуума PCM с использованием программного пакета GAUSSIAN 98 проведены расчеты комплексов $[\text{Bi}(\text{H}_2\text{O})_x(\text{SC}(\text{NH}_2)_2)_y]^{3-y}$, а также комплексов с нестабильными степенями окисления Bi(II) и Bi(I) , которые могут рассматриваться как интермедиаты в процессе стадийного электровосстановления исходных комплексов Bi(III) . Рассчитана структура комплексов при различных значениях x и y , а также на основе рассчитанных термодинамических параметров образования установлены наиболее стабильные формы комплексов.

Оценены стандартные электродные потенциалы отдельных стадий электровосстановления комплексов Bi(III) . В рамках современной квантово-механической теории диссоциативного электронного переноса в неадиабатическом приближении оценены активационные параметры элементарного акта стадийного электровосстановления и предложена схема, описывающая детальный механизм этого процесса.